



TITLE:

2.転送積分によるFK系の比熱の数  
値計算(岡山大学大学院理学研究科  
物理学専攻,修士論文題目・アブス  
トラクト(1990年度))

AUTHOR(S):

松本, 徳真

---

CITATION:

松本, 徳真. 2.転送積分によるFK系の比熱の数値計算(岡山大学大学院理  
学研究科物理学専攻,修士論文題目・アブストラクト(1990年度)). 物性  
研究 1991, 57(1): 168-169

ISSUE DATE:

1991-10-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/94690>

RIGHT:

0.59( $x_c$ :critical percolation concentration)において,  $C(t) \propto t^{-d(x)/2}$ に従って減衰するが(有効次元数  $d(x)$ は,  $x$ とともに減少する),  $x$ の小さい希釈系では,  $C(t)$ が  $t \rightarrow \infty$ でも有限値にとどまることが報告されている。

本論文では, まず, この2次元希釈系で, 磁性イオンの濃度を変化させたとき, 最隣接交換相互作用によって結合したスピン・クラスターがどのように形成されるかを調べる。つぎに,  $x$ の小さい希釈系に存在するスピン・クラスターの種類, 個数, 及びそれらに属するスピンの動的性質について考察し, 小さいスピン・クラスターでは, 交換相互作用のためクラスターの全合成スピンが運動の恒量であることから, スピンの動的挙動に顕著な特性があることを示す。さらに, これらのクラスターによる寄与を考慮して,  $x$ の小さい希釈系における  $C(t)$ に対するシミュレーションの結果を再現することを試み, long timeで残るその有限値が, 孤立スピンによるものに加えて, 各クラスターからの寄与によるものであることを示す。

## 2. 転送積分による FK 系の比熱の数値計算

松 本 徳 真

Frenkel-Kontorova (FK) モデルは, J.Frenkel, T.Kontorova によって, 転位の構造を記述するために提案された1次元結晶のモデルである。このモデルは, 間隔  $a$  で調和的に接続された粒子に, 周期  $b$  の周期ポテンシャルが作用している系で構成されている。

このモデルは, その後, 多くの物質, 現象の研究に応用されてきた。例として, 超イオン導電体, 電価密度波, 結晶のエピタキシャル成長, 一次元強磁性体等があり, 固体の物性の研究に於て, 重要な役割を担っている。

本論文では, ミスフィットの無い FKモデル ( $a = b$ ) の比熱を, 転送積分(TI)の方法を用い, 数値的に求める事を試みる。TI法の当系への適用は, T.Schneider, E.Stoll により研究されているが, 彼らは, 粒子間の結合の強さが, 周期ポテンシャルの大きさに比べ, 十分に強い場合を取扱った。実際には,  $a \neq b$  の場合や, 周期ポテンシャルの寄与が大きい場合にも興味ある問題は多いが,  $a \neq b$  の

場合へのT I法の適用は本論文では触れない。主に周期ポテンシャルの大きさと粒子間の結合力の強さの比が異なる場合の計算を行い、その結果について議論する。

周期ポテンシャルの大きさの、粒子間の結合力の強さに対する比が、比較的大きな場合には超イオン導電体の問題があり、K.Takahashi, I.Mannari, T.Ishii らが、モンテカルロ・シミュレーション(MC)の方法で、精力的に計算を行っており、その結果との比較を行う。

ここで使用したT I方程式は、それ自体は厳密なものであるが、これを、解析的に解くことはできない（近似によるアプローチは様々な方法がある）。そこで、数値計算に頼る事になるのであるが、その方法には若干の問題が残されている。その一つは、本来無限区間の定積分である所を有限区間の離散的な和（台形公式）として処理している点にある。この点については、最後に触れる。今後の課題として、実際に計算するには至っていないが、幾つかの改良された方法の提案を行う。

### 3. 2次元3角格子の Spin density wave 状態

中 西 知 己

2次元電子形のSDW状態について、簡単なmodelを使って調べた。

ここではmodelとしてHubbard modelを用いている。これは電子間のCoulomb相互作用を同一格子点上のみに限定し、又格子点間にはある大きさのhoppingがあるという、固体のmodelとしては非常に簡単で基本的なものである。このmodelをもとにいくつかのspin density wave(SDW)状態について系のenergy, band構造を評価した。

正方格子では、half fillingについて、antiferro(AF)パターンが最も安定であることは既に確認されている。それに対して、3角格子においてAFパターンはフラストレーションを持つため、それほど低いenergyを持つことができない。このため、より複雑なSDW状態によってさらに低いenergyが実現され得る。これまでは、経験的に120度構造が最も安定であろうとされていたが、今回の計算でより多くのパターンを調べることによってこの予想をさらに裏付けること